

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ  
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ ІМЕНІ ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

КУЛІКОВ КОСТЯНТИН ВЯЧЕСЛАВОВИЧ



*Kulikov K.V*

[УДК 621.382](#)

МЕТОД МОДЕЛЮВАННЯ ІМПУЛЬСНИХ ТА  
ЧАСТОТНИХ  
ХАРАКТЕРИСТИК ІІІ-НІТРИДІВ

Спеціальність 05.27.01 - Твердотільна електроніка

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата технічних наук

Київ – 2021

Дисертацією є рукопис

Робота виконана у Національному технічному університеті України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» Міністерства освіти і науки України на кафедрі електронної інженерії.

Науковий керівник: кандидат технічних наук, професор  
**Москалюк Володимир Олександрович**  
Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут ім. Ігоря  
Сікорського»,  
професор кафедри електронної інженерії

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор  
**Осінський Володимир Іванович,**  
головний технолог проектів ПрАТ «Компанія  
Росток»

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Малик Орест Петрович,**  
Національний університет «Львівська  
політехніка»,  
професор кафедри напівпровідникової  
електроніки

Захист відбудеться 29 квітня 2021 р. о 14 годині 30 хвилин на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.002.08 Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут» за адресою: 03056, м. Київ, пр. Перемоги, 37, корп. 12, ауд. 412.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського», 03056, м. Київ, проспект Перемоги, 37.

Автореферат розісланий 29 березня 2021 р.

Вчений секретар спеціалізованої  
вченої ради,  
к.т.н, доцент

  
В. Г. Артюхов

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Вивчення різного типу нерівноважних процесів у напівпровідниках залишається однією з найбільш затребуваних областей вивчення у сучасній електроніці. Це обумовлено необхідністю підвищення ефективності, функціональності та частотного діапазону активних напівпровідникових компонентів.

Пошук йде у напрямках як знаходження нових ефектів та явищ, так і більш повного використання традиційних ефектів і еволюційного вдосконалення існуючих приладів. Це стає можливим завдяки покращенням у технології виготовлення напівпровідникових структур та результатам фундаментальних досліджень властивостей та внутрішньої будови напівпровідникових матеріалів.

Робота сконцентрована навколо побудови чисельної моделі дрейфових процесів у сильному полі для напівпровідникових матеріалів групи  $A^{III}B^V$ , зокрема III-нітридів, які саме зараз знаходяться у фазі активного впровадження, вдосконалення та використання у найсучаснішій електроніці. З'ясування верхньої граничної частоти провідності для цієї групи напівпровідників дозволить прогнозувати розвиток та перспективність подальших капіталовкладень. Саме чисельна модель дозволяє прогнозувати та перевіряти припущення без дорогих та екологічно небезпечних натурних експериментів.

Із зроблених теоретичних модельних оцінок та отриманих результатів можна стверджувати, що прилади на III-нітридах можуть працювати на частотах біля 1ТГц, що підтверджує перспективність та актуальність подальшого вивчення та розробки реальних приладів.

Додатково треба зауважити аналітичність та відносну обчислювальну простоту методу, що дозволяє адаптувати результати для використання з іншими напівпровідниковими матеріалами та ефектами і отримувати результати швидко та дешево.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Робота виконана на кафедрі електронної інженерії Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Вона виконувалась у рамках таких НДР:

- «Дослідження субмікронних та нанорозмірних структур на основі перспективних напівпровідникових матеріалів», 2008, УДК 621.382, номер держреєстрації 0108U0005938;
- «Дослідження новітніх нанорозмірних напівпровідникових структур та приладів для розроблення і впровадження технологій їх виготовлення», 2008, УДК 621:382, номер держреєстрації 0107U002392;

- «Дослідження наногетероструктур на потрійних сполуках  $A^{III}B^V$  для моделювання їх електронних властивостей та ефектів», 2017, УДК 621:382, код КВНТД 1.2 12.27.01, номер держреєстрації 0115U000400.

**Мета та завдання дослідження.** Досягнутою головною *метою роботи* є розроблення методу моделювання динамічних характеристик багатодолинних напівпровідникових матеріалів групи  $A^{III}B^V$ , зокрема III-нітридів, для прогнозування їх верхніх граничних частот.

Для досягнення цієї цілі було вирішено наступні *завдання*:

1. Розробити метод моделювання динамічних характеристик багатодолинних напівпровідникових матеріалів групи  $A^{III}B^V$ , який базується на кінетичному рівнянні з модельними спрощеннями;
2. Вдосконалити модель перенесення носіїв у багатодолинних напівпровідниках з урахуванням часів релаксації імпульсу та енергії для різних видів розсіювання (у тому числі міждолинного);
3. Дослідити реакцію носіїв на високочастотні електричні поля і визначити максимальні частоти існування від'ємної диференційної провідності (ВДП) для досліджуваних напівпровідникових матеріалів;
4. Дослідити реакцію носіїв на імпульсні електричні поля у матеріалах групи  $A^{III}B^V$  для: а) аналізу ефекта сплеску у часі (*overshoot*) дрейфової швидкості носіїв, б) можливостей досліджуваних матеріалів щодо довжини балістичного прольоту носіїв, в) оцінки граничних частот в залежності від напруженості електричного поля.

**Об'єкт та предмет дослідження.** *Об'єктом дослідження* є електричні властивості та модель електронного транспорту в багатодолинних напівпровідниках групи  $A^{III}B^V$  на прикладі III-нітридів у сильних електричних полях. *Предмет* - імпульсні та динамічні характеристики багатодолинних напівпровідникових сполук групи  $A^{III}B^V$ .

**Методи дослідження.** У роботі використано метод релаксаційних рівнянь у частинних похідних у наближенні часів релаксації імпульсу та енергії; методи чисельного розв'язку систем диференціальних рівнянь Рунге-Кути 4-го порядку; дослідження спектру провідності за допомогою перетворення Фур'є; для чисельного моделювання використовувались сучасні комп'ютерні математичні програми. Достовірність отриманих результатів підтверджується узгодженням розрахованих за допомогою запропонованих методик характеристик відомих параметрів з літературними даними та теоретичними і експериментальними результатами.

**Наукова новизна отриманих результатів.**

1. Вперше запропоновано метод моделювання динамічних характеристик багатодолинних напівпровідникових матеріалів групи  $A^{III}B^V$ , який базується на рівняннях збереження імпульсу та енергії у наближенні

часів релаксації, і дозволяє отримувати оцінку імпульсних та частотних властивостей III-нітридів в сильному електричному полі.

2. Вдосконалено математичну модель електронного транспорту у формі системи диференціальних рівнянь у частинних похідних, для якої вперше отримано аналітичні вирази для часів релаксації імпульсу та енергії для різних видів розсіювання, зокрема міждолинного.

3. Встановлено закономірності та особливості процесів розігрівання електронного газу у багатодолинних напівпровідниках групи  $A^{III}B^V$  у сильних електричних полях, пов'язані з особливостями зонної структури та міждолинними переходами.

4. На основі методу та математичної моделі встановлено особливості: руху носіїв III-нітридів у сильних змінних у часі та просторі електричних полях; розподілу концентрації носіїв у долинах у залежності від напруженості електричного поля, закономірності імпульсної провідності. Це дало змогу здійснити порівняльний аналіз різних методів оцінки граничних частот провідності багатодолинних напівпровідників і запропонувати новий, якій ґрунтується на спектральному аналізі відгуку носіїв на імпульсне електричне поле.

#### **Практичне значення отриманих результатів.**

1. Розроблена модель у вигляді релаксаційних рівнянь придатна для аналізу електронного транспорту у сильному електричному полі і дозволяє моделювати динамічні ефекти, специфічні для субмікронних розмірів приладів.

2. Розроблено новий підхід до оцінки верхніх граничних частот напівпровідників, зокрема III-нітридів, що відрізняється від поширених раніше. Критерії визначення верхніх граничних частот здійснено на основі порівняння існуючих методів та запропонованого нового і мають практичне значення за умови використання приладу не у режимі існування від'ємної диференціальної провідності чи режиму генерування у діоді Гана.

3. Отримані аналітичні вирази для розрахунку часів релаксації, зокрема міждолинної, дозволяють аналізувати внесок окремих видів розсіювання на енергетичні і швидкісні характеристики матеріалів.

4. Вперше здійснено розрахунок верхніх граничних частот III-нітридів не тільки за критеріями існування від'ємної диференціальної провідності чи режиму генерування у діоді Гана, але і через спектральне перетворення відгуку дрейфової швидкості на імпульс електричного поля.

5. Отримано характеристики тестових твердотільних структур та зроблено порівняння модельних та експериментальних даних.

Отримані моделі та співвідношення дозволяють вивчати більш широкий спектр наукових питань, а також оптимально обрати напівпровідниковий матеріал під технічне завдання на розробку пристрою. Звузивши кількість

натурних експериментів завдяки заздалегідь розрахованому оптимальному напівпровідниковому матеріалу за моделлю вирішуються практичні питання здешевлення розробки нових пристроїв та прискорення їх виходу на ринок.

Метод дозволяє цілеспрямовано проводити відбір режимів, які практично необхідні для функціонування пристрою та не обмежується тільки частотними характеристиками чи тільки III-нітридами.

#### **Особистий внесок здобувача.**

Здобувач безпосередньо приймав участь у побудові моделі дрейфового руху носіїв у багатодолинних напівпровідниках у релаксаційному наближенні, моделюванні та дослідженні ефект сплеску (*overshoot*) дрейфової швидкості носіїв і, відповідно, спектральних особливостей її відгуку на імпульсну дію електричного поля. Вперше опублікував результати модельних розрахунків максимальних частот існування від'ємної диференційної провідності (ВДП) для досліджуваних матеріалів та запропонував альтернативний метод оцінки верхніх граничних частот за спектральною характеристикою відгуку дрейфової провідності напівпровідника на електричне поле за реакцією на короткий імпульс.

#### **Апробація результатів дисертації.**

Основні результати дисертації були повідомлені та обговорювались 11 разів на 10 міжнародних конференціях: міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы физической и биомедицинской электроники» (Київ, 12-14 червня 2001); міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы Электроники» (Київ, 17-19 червня 2003); XXV міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы Электроники» (Київ, 19-21 квітня 2005); XXVI міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы Электроники» (Київ, 11-13 квітня 2006 – дві доповіді за різними темами); II міжнародній науково-технічній конференції «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології» COMINFO'2006 (Київ-Кацивелі, 8-14 жовтня 2006); XXVII міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы Электроники» (Київ, 17-19 квітня 2007); XXIX міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы Электроники» (Київ, 15 квітня 2009); 2016 IEEE 36th International Conference on ELECTRONICS and NANOTECHNOLOGY (ELNANO-2016) (Kyiv, Ukraine, 19 – 21 April 2016); The Second IEEE International Conference on Information and Telecommunication Technologies and Radio Electronics (UkrMiCo'2017) (Odesa, Ukraine, 11-15 September 2017); 2018 IEEE 38th International Conference on ELECTRONICS and NANOTECHNOLOGY (ELNANO-2018) (Kyiv, Ukraine, 24 – 26 April 2018); 2019 IEEE 39th International Conference on ELECTRONICS and NANOTECHNOLOGY (ELNANO-2019) (Kyiv, Ukraine, 16 – 18 April 2019).

### Публікації.

За матеріалами дисертації опубліковано в 22 науковій праці, в тому числі 13 статей [1] [2] [5] [6] [8] [9] [10] [11] [12] [14] [17] [18] [22] у провідних фахових виданнях (1 у виданні країни, що входить до ЄС; 3 у виданнях України, які включені до міжнародних наукометричних баз) та 9 робіт у збірниках тез конференцій [3] [4] [7] [13] [15] [16] [19] [20] [21].

**Структура дисертації.** Дисертацій складається зі вступу, 3 розділів та загальних висновків. Робота викладена на 142 сторінках і містить 45 малюнків, 2 таблиці і список використаних джерел з 79 найменувань.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** наведено загальну характеристику роботи, обґрунтовано актуальність проблеми, сформульовано мету та основні завдання досліджень, викладено наукову новизну, показано практичну цінність отриманих результатів.

У **першому розділі** проведено розгляд особливостей напівпровідникових матеріалів  $A^{III}B^V$  з азотом та їх переваги у порівнянні з іншими матеріалами (Рис. 1, 2). Зокрема обрано параметри матеріалів з різних джерел для подальшого використання під час моделювання (Табл. 1).

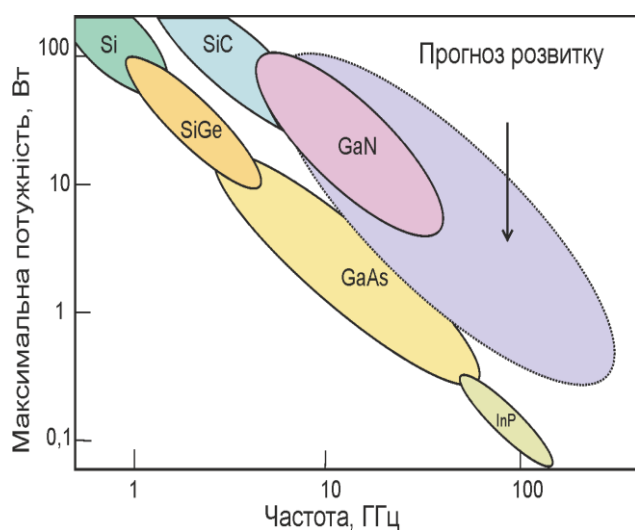


Рис 1. Напівпровідникові матеріали та перспективи їх використання.

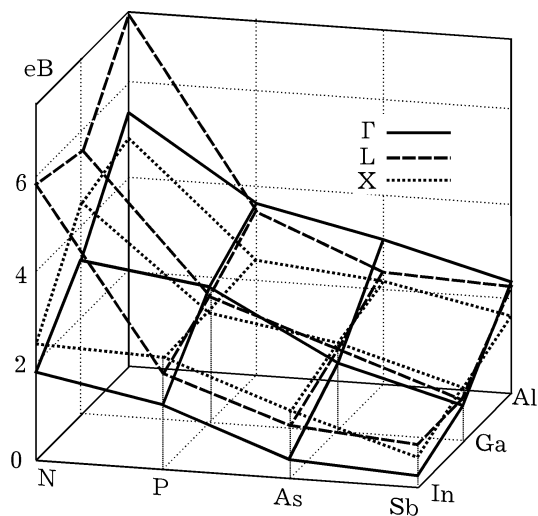


Рис 2. Залежності ширини забороненої зони у різних точках симетрії ( $\Gamma$ , L та X) зони Бріллюєна від складу з'єднання

Крім того наведено огляд існуючих методів оцінювання граничних частот III-нітридів та обмеження і переваги їх використання. Розглянуто метод знаходження частоти першої гармоніки у ідеалізованому режимі обмеження накопичення об'ємного заряду (ОНОЗ) та граничної частоти існування ВДП.

Табл. 1. Обрані для моделювання параметри InN, GaN та AlN.

Параметр	InN		GaN		AlN	
	куб.	гекс.	куб.	гекс.	куб.	гекс.
Діелектрична проникність:						
статична, $\epsilon_{ст}$	14,86	15,3	9,6	8,9	8,41	9,14
високочастотна, $\epsilon_{в}$	8,04	9,3	5,5	5,35	5,32	4,84
середня, $\epsilon$	11,0	12,2	9	6,5	7,5	7,2
Енергія іонізації, eV	0,005		0,013		0,019	
Густина, $10^3 \text{ кг/м}^3$	6,81		6,15		3,26	
Швидкість звуку (поздовжня), $10^3 \text{ м/с}$	5,2	6,56	4,57	6,56	6,56	
Акустичний деформаційний потенціал, eV	5,0	4,1	5,0	8,3	9,4	8,0
Константа міждолинного зв'язку, $10^{10} \text{ eV/м}$	8	10	11,1	10	11,1	
Енергія оптичних фононів, eV	0,03	0,057	0,059	0,073	0,062	0,055
Енергія міждолинних фононів, eV	0,041	0,073	0,05	0,05	0,08	0,08
Міждолинні відстані, eV	$\Delta_{ГХ}=0,57$	$\Delta_{ГА}=0,7$	$\Delta_{ГХ}=1,1$	$\Delta_{Г1LM}=2,1$	$\Delta_{ГХ}=1,1$	$\Delta_{ГML}=0,7$
	$\Delta_{ГЛ}=3,88$	$\Delta_{Г1I}=1,1$	$\Delta_{ГЛ}=1,9$	$\Delta_{Г1Г2}=1,9$	$\Delta_{ГЛ}=4,4$	$\Delta_{ГK}=1,0$
	$\Delta_{LX}=3,31$	$\Delta_{Г1A}=0,4$	$\Delta_{XL}=0,6$	$\Delta_{Г2LM}=0,2$	$\Delta_{LX}=3,3$	$\Delta_{MLK}=0,3$
Ефективні маси:	$0,64m$	$0,4m$	$0,15m$	$0,2m$	$0,17m$	$0,14m$
нижні долини	$0,64m$	$0,5m$	$0,15m$	$0,21m$	$0,2m$	$0,45m$
	$0,64m$	$1,09m$	$0,15m$	$0,45m$	$0,25m$	$0,55m$
	$0,64m$	$1,09m$	$0,15m$	$0,45m$	$0,25m$	$0,55m$
верхні долини	$0,48m$	$0,8m$	$0,35m$	$0,35m$	$0,6m$	$0,8m$
	$0,41m$	$1m$	$0,36m$	$0,91m$	$0,65m$	$1m$
	$1,16m$	$3,5m$	$1,7m$	$2,7m$	$2,8m$	$2,8m$



Аналіз існуючих засобів для моделювання фізичних процесів у напівпровідниках показав перевагу методів, які ґрунтуються на кінетичному рівнянні. Серед них привертає увагу метод релаксаційних рівнянь своєю достатньою інформативністю та відносно простою реалізацією. Він дозволяє моделювати процеси електронного транспорту у багатодолинних напівпровідниках у сильному електричному полі.

Окремо зауважимо, що аналіз наявних експериментальних даних, а зокрема деяка їх суперечливість, можна вважати доказом необхідності подальшого вивчення особливостей матеріалів. Саме цій меті присвячені наступні дослідження.

У **другому розділі** дисертації проаналізовано використовувані засоби моделювання електронних процесів у напівпровідниках. Вони отримані внаслідок усереднення кінетичного рівняння (1) по  $k$ -станах у припущенні максвеллівського розподілу електронів з електронною температурою  $T_e$ .

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial N}{\partial \vec{k}} = \left[ \frac{\partial N}{\partial t} \right]_c, \quad (1)$$

Використовуючи спрощення кінетичного рівняння наближенням часів релаксації, отримано в рівняннях для концентрації, імпульсу та енергії (2) їх швидкості розсіювання за рахунок співударянь

$$\begin{aligned} \left( \frac{dn}{dt} \right)_c &= - \int_{V_k} \frac{(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{\Delta n}{\tau_n} \\ \left( \frac{d\vec{p}_\Sigma}{dt} \right)_c &= - \hbar \int_{V_k} \frac{\vec{k}(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{n\vec{p}}{\tau_p} \\ \left( \frac{dE_\Sigma}{dt} \right)_c &= - \int_{V_k} \frac{E(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{n(E - E_0)}{\tau_E} \end{aligned} \quad (2)$$

Саме ці вирази визначають метод усереднення швидкостей розсіювання  $1/\tau$  для розрахунку відповідних часів релаксації, необхідних для розв'язку рівнянь. Для різних видів розсіювання отримано аналітичні співвідношення. У підсумку досліджувана модель являє собою систему релаксаційних рівнянь, які записуються для кожної долини і об'єднуються концентраційними рівняннями. Така модель добре протестована для «класичних» однодолинних та багатодолинних напівпровідників на розрахунках параметрів та характеристик у сильних електричних полях. Зауважимо, що вхідні параметри цієї моделі практично співпадають з такими для кінетичного моделювання методом Монте-Карло.

Ретельно розглянуто особливості розсіювання носіїв та відмінності для багатодолинних напівпровідників (3) у дводолинному наближенні.

$$\begin{aligned}
 \frac{dn_i}{dt} &= -\frac{n_i}{\tau_{nij}} + \frac{n_j}{\tau_{nji}} \\
 1/\tau_{nji} &= \int_{V_{k'}} \lambda_{ji} N(k') dV_{k'} / \int_{V_{k'}} N(k') dV_{k'} \\
 d(n_i \vec{p}_i) / dt - n_i \vec{F} &= -n_i \vec{p}_i / \tau_{pi} \\
 d(n_j \vec{p}_j) / dt - n_j \vec{F} &= -n_j \vec{p}_j / \tau_{pj} \\
 \frac{d(n_i E_i)}{dt} - n_i \vec{v}_i \vec{F} &= -\frac{n_i (E_i - E_0)}{\tau_{Ei}} \\
 \frac{d(n_j E_j)}{dt} - n_j \vec{v}_j \vec{F} &= -\frac{n_j (E_j - E_0)}{\tau_{Ej}}
 \end{aligned} \tag{3}$$

Суттєвою методичною відмінністю даної моделі від методу Монте-Карло та від існуючих подібних програм є те, що замість релаксаційного рівняння для енергії електрона використовується рівняння для електронної температури (4)(5) як міри їх середньої енергії і яке необхідне для розрахунків поле-температурної характеристики

$$\frac{dE_T}{dt} = -\frac{E_T - E_0}{\tau_E} - \frac{E_D}{\tau_E} + \frac{2E_D}{\tau_p} = \frac{E_T - E_0}{\tau_E} + \frac{E_D}{\tau_E} \left( \frac{2\tau_E}{\tau_p} - 1 \right), \tag{4}$$

$$T_e = T + \frac{m^2 \mathcal{E}^2 m^* (\gamma - 1)}{3k_B}. \tag{5}$$

Також зроблено верифікацію моделі співставленням результатів моделювання «типових» характеристик з результатами інших авторів для підтвердження перш за все функціональних можливостей використаних міркувань, її працездатності та адекватності.

Враховуючи фундаментальність та широкі можливості методу кінетичного рівняння, обрано метод релаксаційних рівнянь, які є результатом усереднення кінетичного рівняння. Ці рівняння мають подібний набір вхідних параметрів і відповідно мають близькі можливості щодо досліджень фізичних процесів. У той же час вони не потребують досить громіздких процедур статистичного усереднювання результатів моделювання, які використовуються у багаточастковому методі Монте-Карло.

На відміну від існуючих подібних моделей тут для знаходження часів релаксації використовуються аналітичні співвідношення, отримані усередненням швидкостей розсіювання для кожного виду, що характерні для методу частинок розв'язку кінетичного рівняння. Зокрема виведено вирази для

розрахунку міждолинних видів розсіювання, як між еквівалентними, так і нееквівалентними долинами.

Для багатодолинних напівпровідників модель має включати як систему рівняння для кожної долини зі своїми параметрами. У такому вигляді вона може враховувати міждолинні переходи і стає придатною для моделювання процесів переносу гарячих носіїв у сильних електричних полях.

На завершення розділу наведено **верифікацію моделі**. Зрозуміло, що прямого експерименту з безпосереднього вимірювання граничних частот бути не може. Тому ми використали співставлення результатів моделювання «типових» характеристик за нашою моделлю з результатами інших авторів для підтвердження перш за все функціональних можливостей моделі, її працездатності та адекватності.

Перевірено придатність моделі для розрахунків рухливості та дрейфової швидкості у сильному електричному полі для германію, кремнію та арсеніду галію як типових, гарно досліджених та широкоживаних напівпровідникових матеріалів.

Для досліджуваних у роботі III-нітридів наведено порівняння з результатами інших дослідників поле-швидкісної характеристики, залежності електронної температури та заселеності долин від напруженості електричного поля. Спроможність моделі перевірялася також на дослідженнях властивостей «сплеску» дрейфової швидкості для III-нітридів, що доводить застосовність моделі для моделювання динамічних характеристик. Приклад порівняння наведено на Рис. 3.

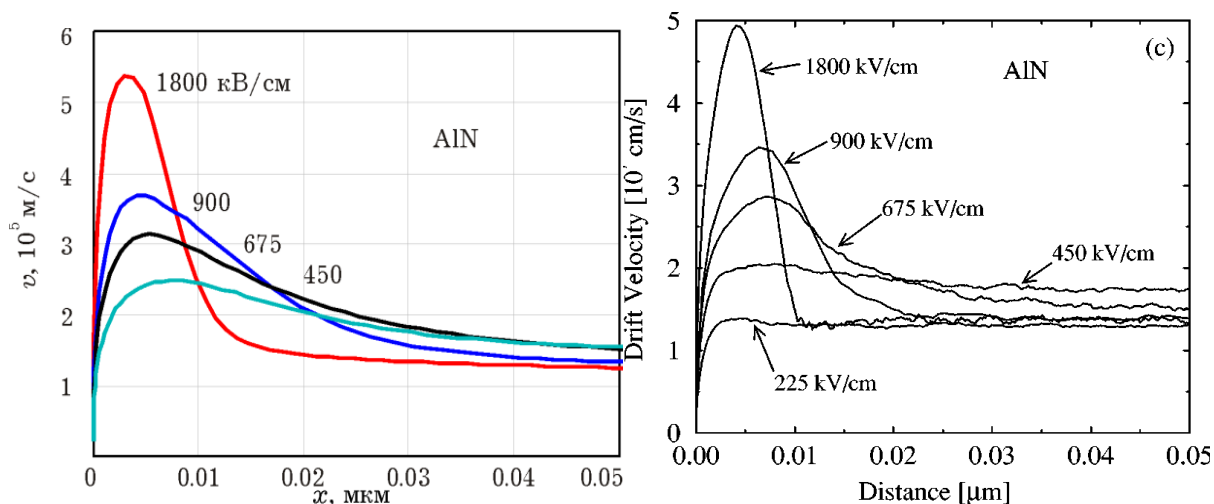


Рис 3. Просторові прояви «сплеску» дрейфової швидкості для нітриду алюмінію. Ліворуч – змодельовані для тих самих значень напруженості електричного поля, що і праворуч, взяті з роботи: Foutz B. E., O’Leary S.K., Shur M.S., Eastman L.F., Transient electron transport in wurtzite GaN, InN and AlN, J. of Appl. Phys., v.85, N. 11, pp.7727-7734.

Наведене порівняння, як нам здається, з хорошою надійністю дозволяє стверджувати про адекватність використовуваної моделі для дослідження динамічних властивостей напівпровідників у сильних електричних полях. Варто зауважити, що при верифікації перш за все ми звертали увагу на функціональні можливості моделі. Кількісні розбіжності є менш суттєвими, вони одного порядку з невизначеністю вхідних даних з різних довідникових джерел.

Далі у **третьому розділі** на основі розробленої моделі проведено аналіз імпульсних властивостей III-нітридів, продемонстровано деталі «сплеску» дрейфової швидкості та його особливості саме для сполук с азотом. Метод оцінки високочастотної провідності (6)

$$\frac{\sigma_{\omega}}{\sigma_0} = \frac{b_{0i}\mu_{0i}F_i(\omega) + b_{0j}\mu_{0j}F_j(\omega)}{b_{0i}\mu_{0i} + b_{0j}\mu_{0j}} \quad (6)$$

продовжує розділ, де наведено міркування щодо існування ВДП у багатодолинних напівпровідниках. Зокрема отримано легку для обчислення формулу межі існування ВДП (7) та надано результати розрахунків (Рис. 4).

$$f_m = \frac{1}{4\pi\tau_{E0}} \sqrt{\frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e}} \quad (7)$$

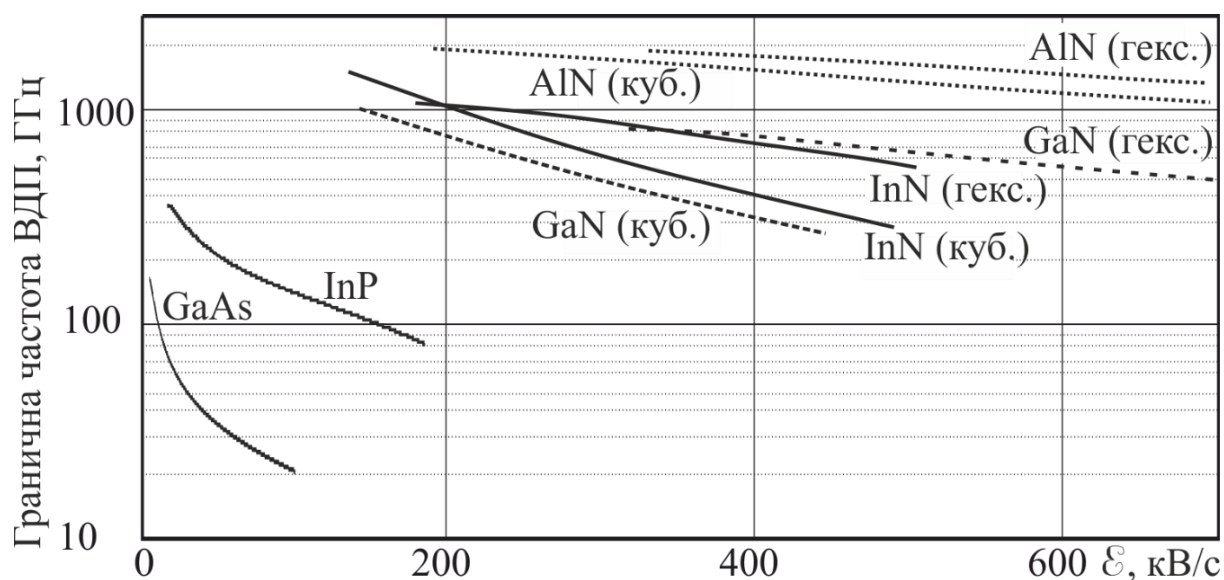


Рис 4. Межа існування від'ємної динамічної провідності для III-нітридів GaN, InN та AlN. «Класичні GaAs та InP наведені для порівняння.

Розраховано поле-швидкісні характеристики III-нітридів (Рис. 5).

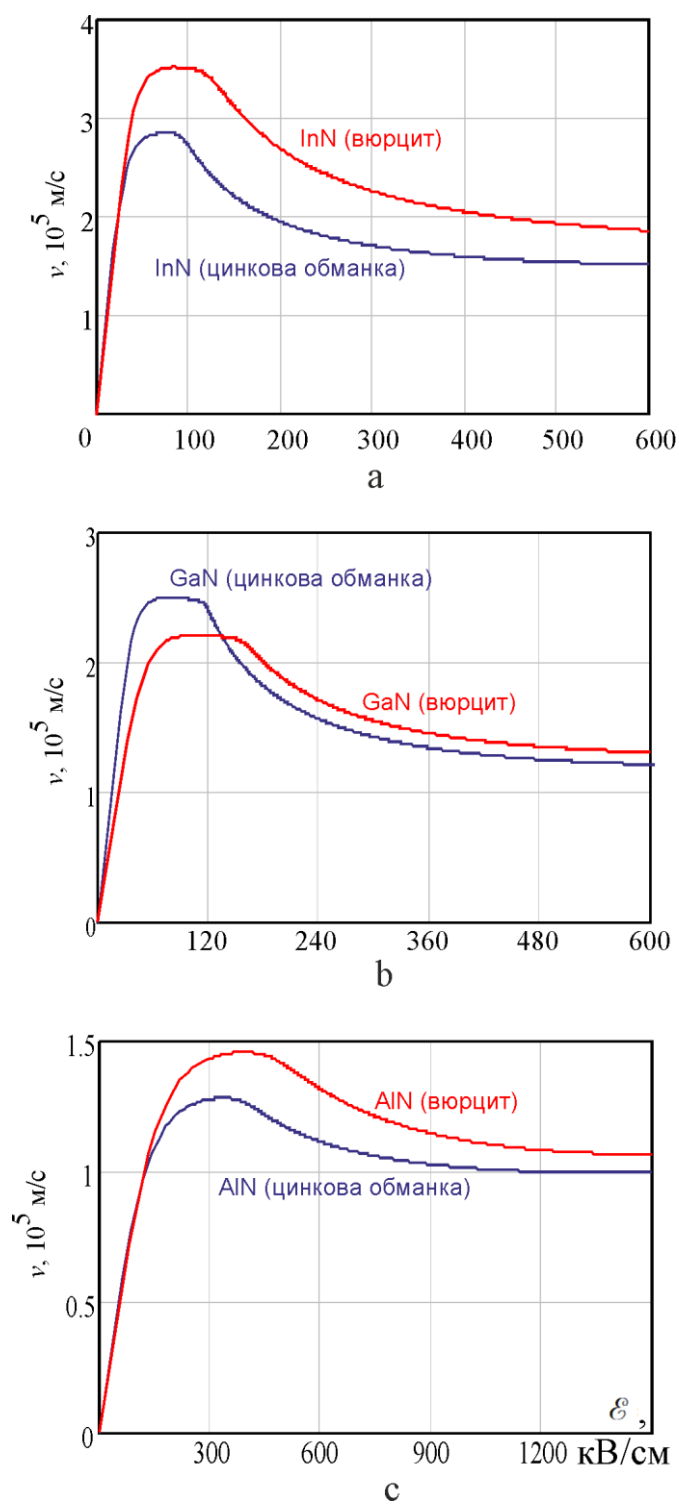


Рис 5. Поле-швидкісні характеристики III-нітридів InN (a), GaN (b) та AlN (c) з кристалічними структурами типу вюрциту чи цинкової обманки.

На завершення розділу надано опис запропонованого нового методу оцінювання граничних частот багатодолинних напівпровідників та новий, відмінний від класичних, метод оцінки за спектральною характеристикою відгуку дрейфової провідності.

Таким чином запропонований новий метод оцінки спектральної характеристики відгуку дрейфової провідності демонструє переваги з точки зору складності підрахунків (модельне спрощення у порівнянні з розрахунками за Монте-Карло) та може використовуватися не тільки у граничних станах (ККД знижується до 0 для генерації у режимі ОНОЗ, чи існування ВДП), а за наявності відповіді у поведінці носіїв на зовнішнє електричне поле.

У четвертому розділі практично використовується запропонований у третьому розділі метод розрахунку для отримання імпульсних властивостей (Результати розрахунків динамічних реакцій на зміни електричного поля у просторі та часі – Рис. 6, 7 та 8), височастотної провідності (приклади на Рис. 9) та граничної частоти за спектральною характеристикою відгуку дрейфової провідності для ІІІ-нітридів (приклад на Рис. 10, 11 та 12). Наведені опис спрощень та можливостей запропонованого підходу.

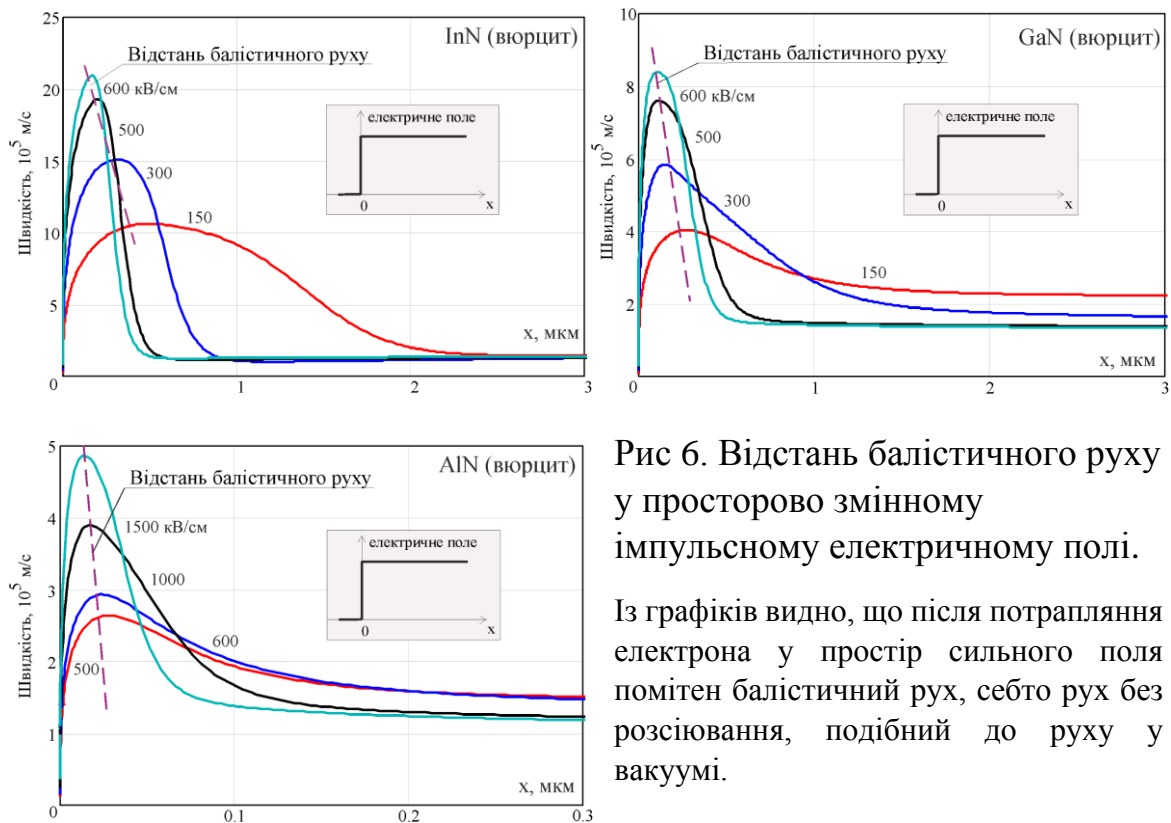


Рис 6. Відстань балістичного руху у просторово змінному імпульсному електричному полі.

Із графіків видно, що після потрапляння електрона у простір сильного поля помітен балістичний рух, себто рух без розсіювання, подібний до руху у вакуумі.

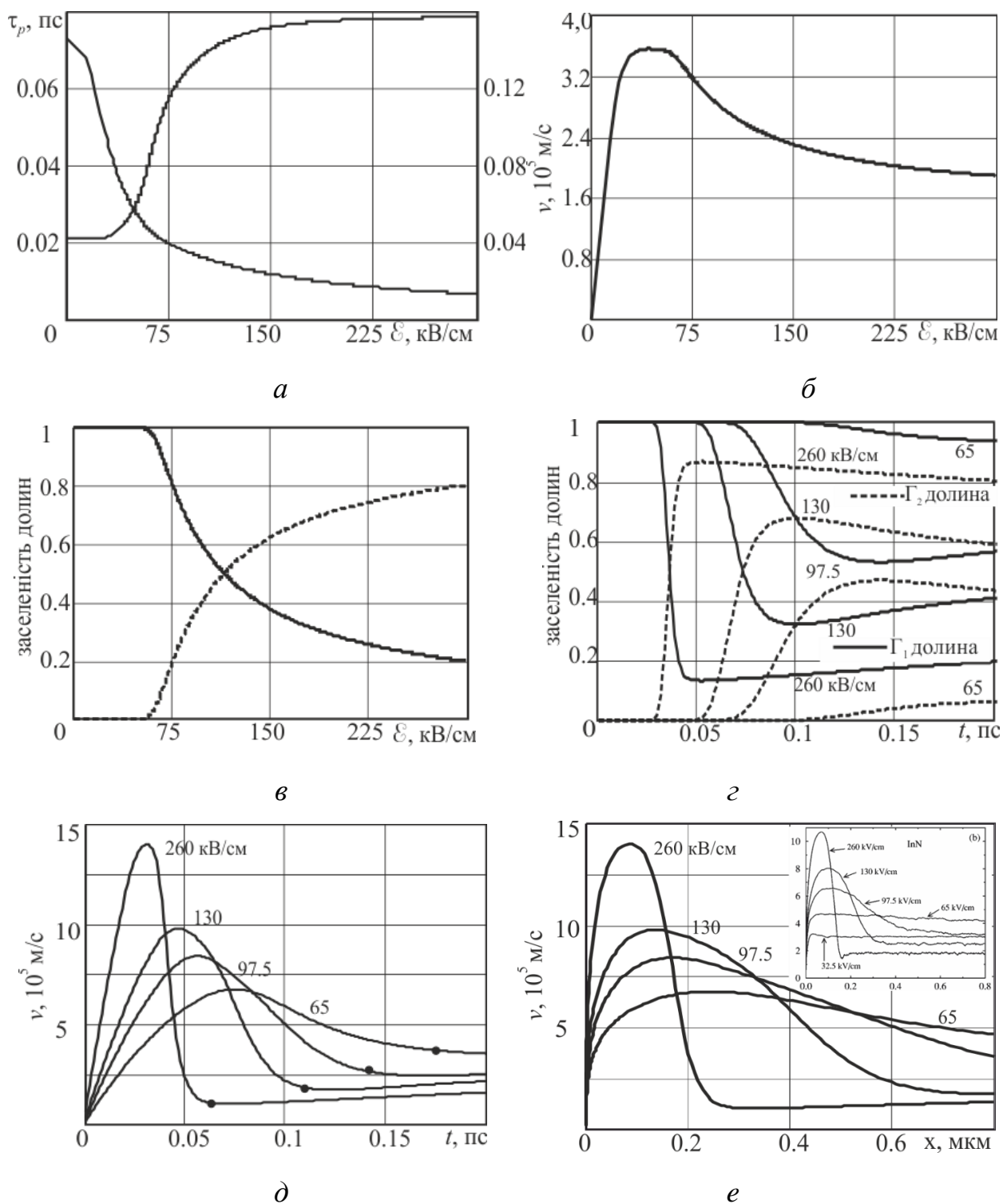


Рис. 7. Результати розрахунків для гексагонального нітриду індію: *a* – часів релаксації імпульсу та енергії, *б* – поле-швидкісної характеристики та *в* – заселеності долин. Динамічні реакції: *г* – заселеності; *д* – дрейфової швидкості (крапки на кривих відповідають значенням часів релаксації імпульсу для вказаної напруженості поля), розраховані для прямокутного імпульсу поля; *е* – просторовий прояв ефекту “сплеску”, для порівняння вставлені результати розрахунків методом Монте-Карло з роботи (Foutz B. E., O’Leary S.K., Shur M.S., Eastman L.F., Transient electron transport in wurtzite GaN, InN and AlN, J. of Appl. Phys., v.85, N. 11, pp.7727-7734)

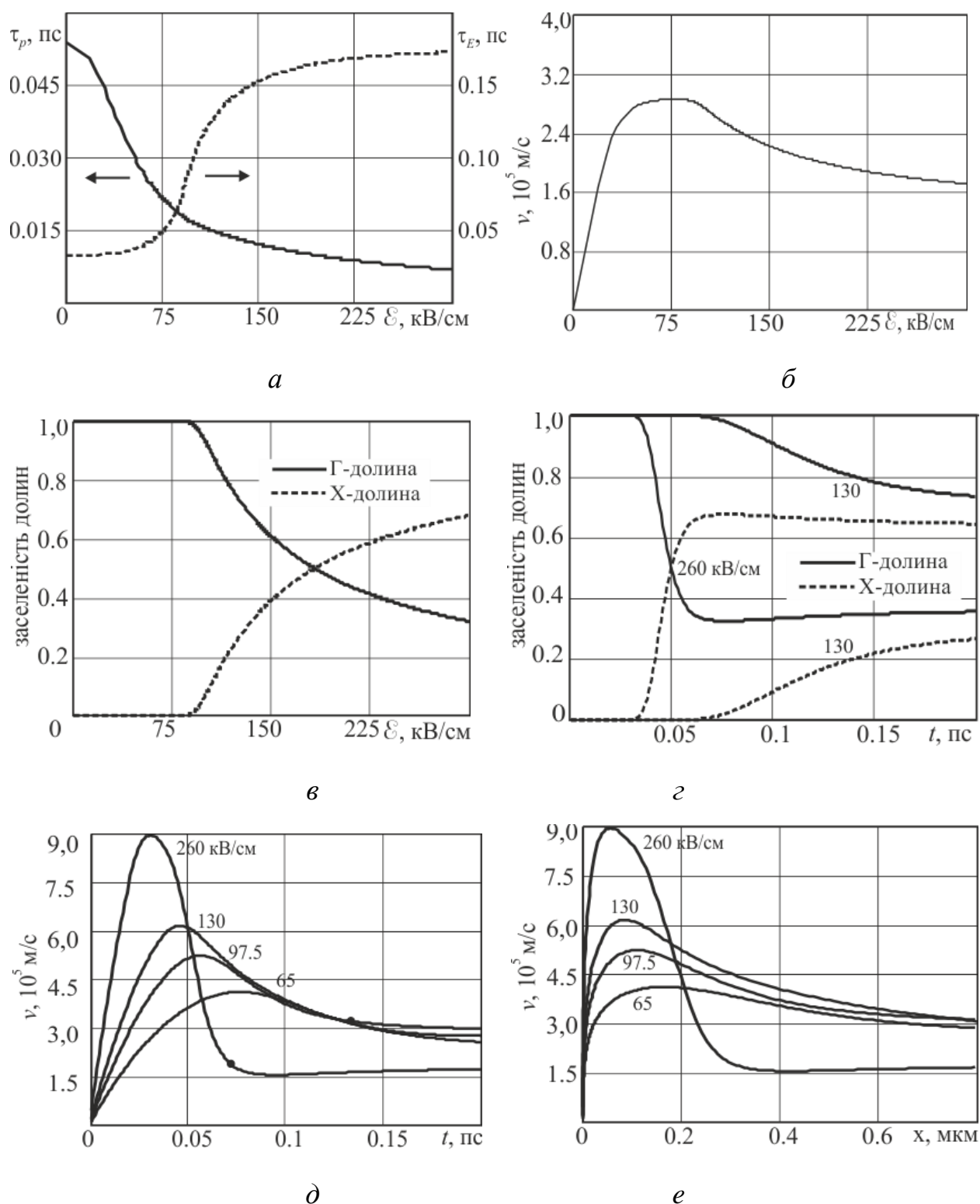


Рис. 8. Результати розрахунків для кубічного нітриду індію: *a* – часів релаксації імпульсу та енергії, *б* – поле-швидкісної характеристики та *в* – заселеності долин. Динамічні реакції: *г* – заселеності; *д* – дрейфової швидкості (крапки на кривих відповідають значенням часів релаксації імпульсу для вказаної напруженості поля), розраховані для прямокутного імпульсу поля; *е* – просторовий прояв ефекту “сплеску”



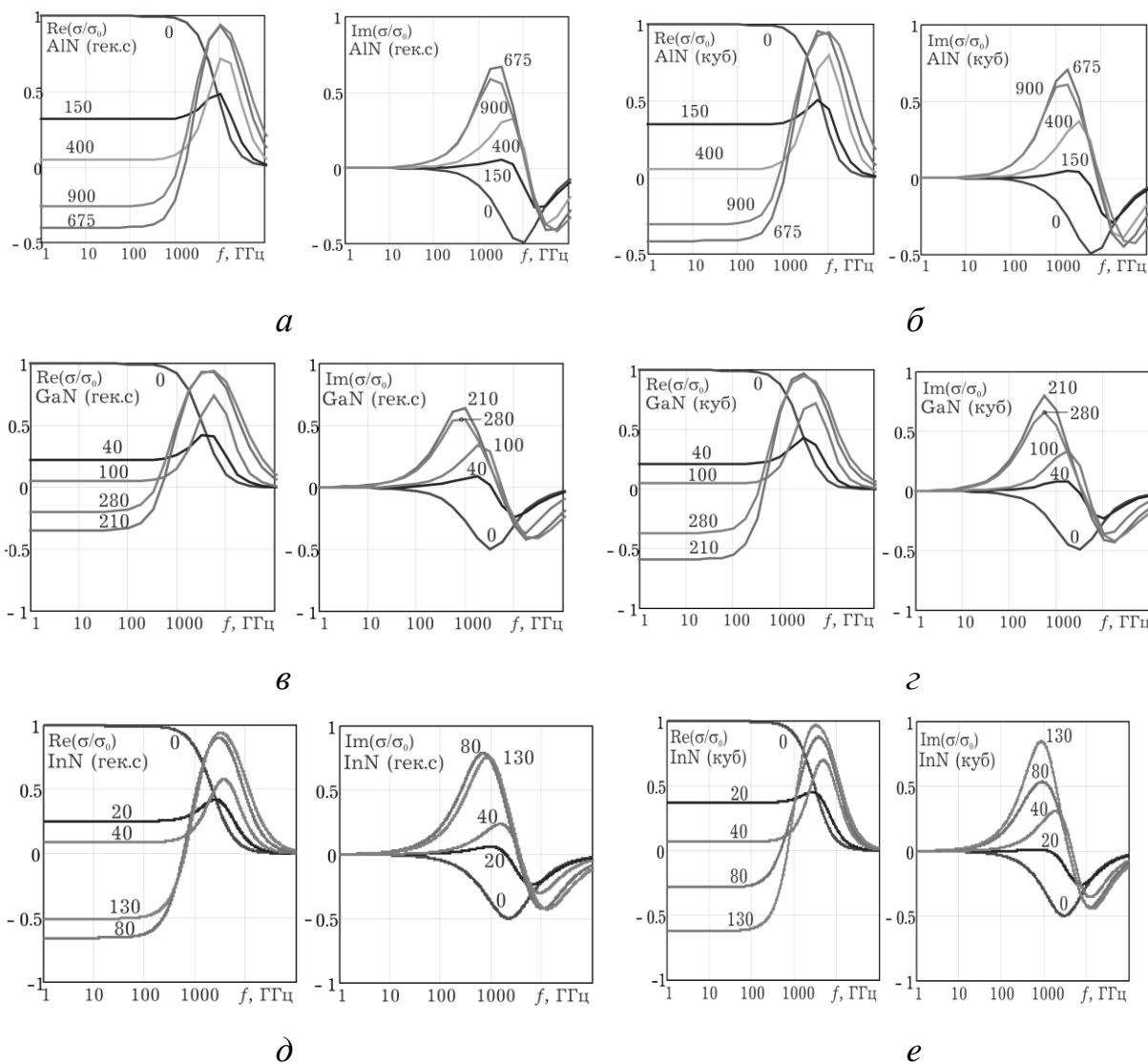


Рис 9. Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної питомої результуючої електропровідності, нормованої на її статичне значення для:

- a* – нітриду алюмінію з гексагональною граткою;
- б* – нітриду алюмінію з кубічною граткою;
- в* – нітриду галію з гексагональною граткою;
- г* – нітриду галію з кубічною граткою;
- д* – нітриду індію з гексагональною граткою;
- е* – нітриду індію з кубічною граткою.

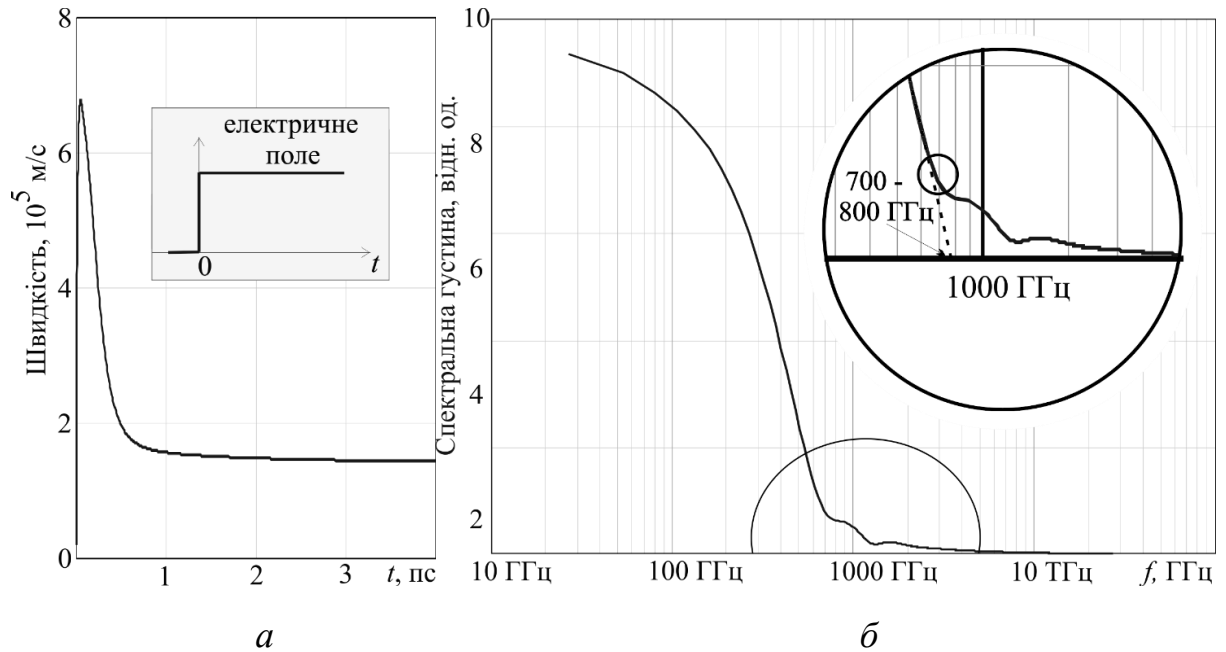


Рис 10. Імпульсна реакція швидкості дрейфу у GaN (гексагональна кристалічна структура) для амплітуди електричного поля 400 кВ/см (а) та відповідна спектральна характеристика (б).

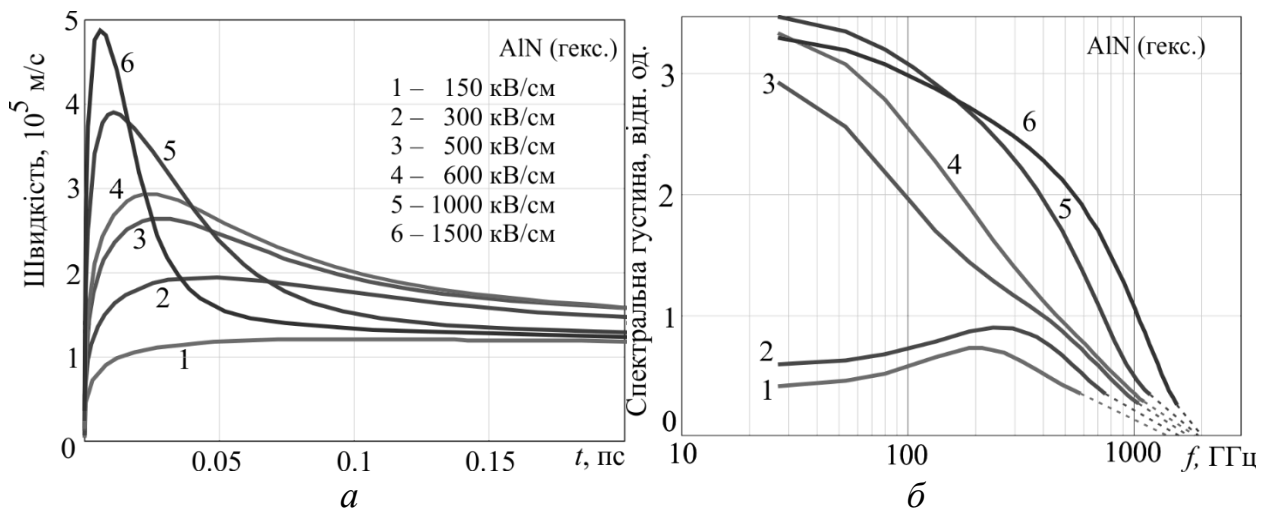


Рис. 11. Кристалічна структура AlN гексагонального типу: а – імпульсні реакції швидкості дрейфу; б – спектральні характеристики швидкості дрейфу для різних значень амплітуди електричного поля

Проведено якісний аналіз графіків спектральної густини з декількох точок зору:

- порівнюючи результати моделювання за різних заданих значень напруженості електричного поля, можливо відстежити кореляцію між відповідною характерною ділянкою на поле-швидкісній характеристиці носіїв та формою графіка спектральної густини перетворення Фур'є. Ділянки з омічною (прямопропорційною) залежністю швидкості дрейфу від поля

характеризуються кривими спектральної густини з чітко вираженими максимумами. Відповідно для спадної ділянки характерне монотонне зростання спектральної густини зі зменшенням частоти. Це явище по різному проявляє себе для різних напівпровідників у полях різної напруженості. Так, для нітриду індію практично для всіх кривих існує максимум, але криві для кубічних і для гексагональних кристалічних решіток для значень, більших 100 кВ/см, помітно відрізняються за формою. Однак для нітриду галію явище спостерігається лише до 100 кВ/см для кубічних і, практично, до 150 кВ/см для кристалів типу вюрцит. Відповідно, для нітриду алюмінію це до 500 кВ/см і до 600 кВ/см.

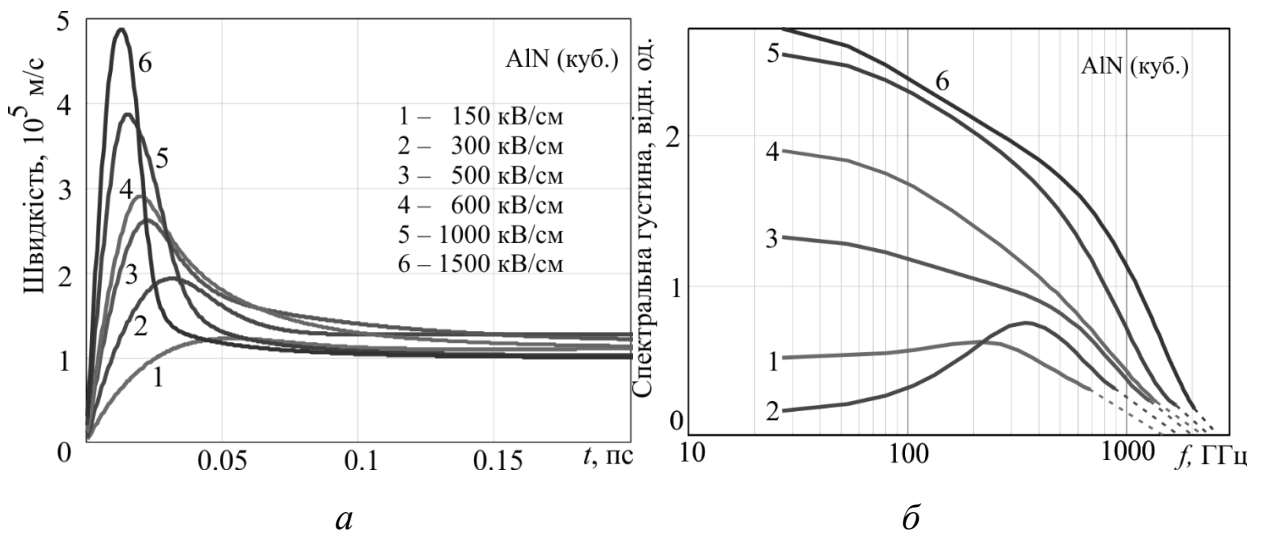


Рис. 12. Кристалічна структура AlN кубічного типу: *a* – імпульсні реакції швидкості дрейфу; *б* – спектральні характеристики швидкості дрейфу для різних значень амплітуди електричного поля

Оскільки різним типовим ділянкам поле-швидкісної характеристики властиве різне переважання тих чи інших видів розсіювання, то на перший погляд здається контрінтуїтивним вплив механізму розсіювання на спектральні властивості. Але усвідомивши, що кожен вид розсіювання носіїв має свій час релаксації і відповідно свою частоту зіткнень, неважко зрозуміти, що продемонстрована кореляція можлива.

- типовою формою цих кривих для сильних полів є практично постійні спектральні густини в низькочастотній частині і її спад у напрямку збільшення частот. Для визначення граничних частот за цих умов необхідно вибрати додаткові критерії або методикку спрощення для обмеження математично нескінченного спектру. Нами запропоновано використання лінійної апроксимації нахилу на високочастотній ділянці. Точку перетину апроксимуючої частини з віссю абсцис можна розглядати як оцінку частоти максимуму матеріалу для вибраних значень полів. Така оцінка здається нам цілком доцільним та достатнім спрощенням, і на відміну від також нашого

підходу [15], не вимагає порівняння з максимальною амплітудою спектральної густини. Тобто цей критерій застосовано до всіх спектральних характеристик, як з максимумами, так і з відносно незмінними спектрами.

Саме такі лінійні наближення відображено **штриховою** лінією на врізці у формі кола на Рис. 12. Значення частот, на яких ми прогнозуємо перетин з віссю абсцис, зібрані разом і наведені в Табл. 2 та відображені графічно на Рис. 13.

Табл. 2. Максимальні частоти III-нітридів за різних значень електричного поля.

$\mathcal{E}$ , кВ/см	$f$ , ГГц					
	InN (кубічна)	InN (гексаг.)	GaN (кубічна)	GaN (гексаг.)	AlN (кубічна)	AlN (гексаг.)
20	400	350	400	400	–	–
50	450	400	450	550	–	–
150	600	550	550	600	1050	1040
300	800	800	650	800	1075	1060
500	1020	1030	900	950	1100	1070
600	1050	1060	1000	1020	1120	1080
1000	–	–	–	–	1130	1090
1500	–	–	–	–	1150	1100

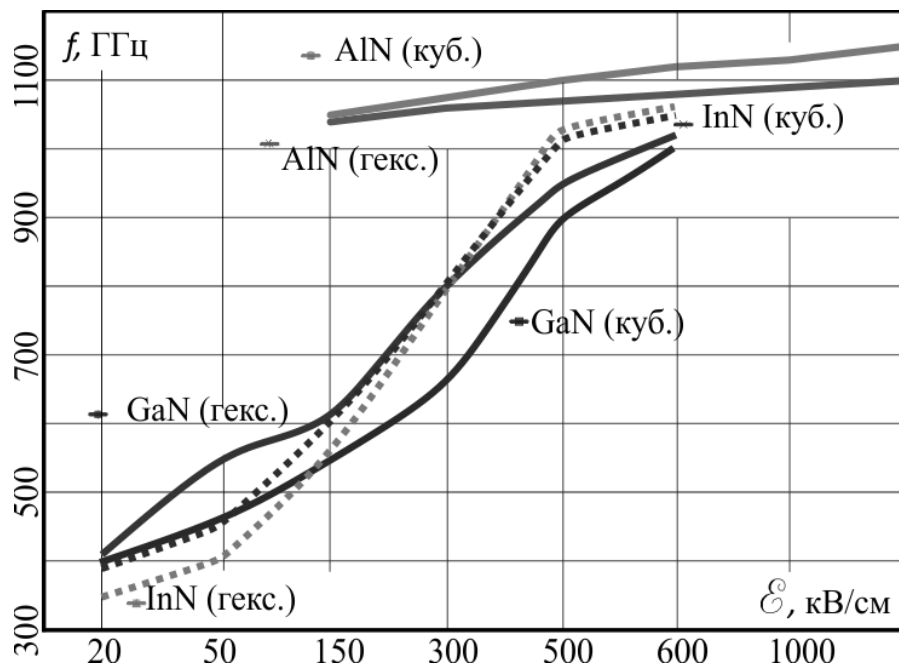


Рис 13. Максимальні частоти GaN, AlN та InN.

## ВИСНОВКИ

1. Запропоновано метод моделювання динамічних характеристик багатодолинних напівпровідникових матеріалів групи  $A^{III}B^V$ , який базується на кінетичному рівнянні з модельними спрощеннями у релаксаційному наближенні, придатний для аналізу електронного транспорту у сильному електричному полі і дозволяє моделювати динамічні ефекти, специфічні для субмікронних розмірів.

2. Вдосконалена математична модель електронного транспорту у вигляді системи диференціальних рівнянь у частинних похідних включає аналітичні вирази для часів релаксації різних видів розсіювання, зокрема міждолинного (вперше в світі). Отримані вирази для розрахунку часів релаксації дозволяють аналізувати внесок окремих видів розсіювання на параметри матеріалів.

3. Описані процеси розігрівання електронного газу стосовно багатодолинних напівпровідників групи  $A^{III}B^V$  у сильних електричних полях визначають особливості протікання основних процесів електронного транспорту і, відповідно, найважливіші електронні параметри матеріалів.

4. На основі досліджень встановлено особливості: а) руху носіїв III-нітридів у сильних змінних у часі та просторі електричних полях; б) розподілу концентрації носіїв у долинах у залежності від напруженості електричного поля; в) закономірності імпульсної провідності, що в свою чергу дало змогу зробити порівняльний аналіз різних методів оцінки граничних частот багатодолинних напівпровідників і запропонувати новий, який відрізняється легкістю розрахунків, співпадінням з результатами інших науковців та більшим діапазоном можливих значень зовнішнього електричного поля.

5. Вперше, на доданок до розрахунків верхніх граничних частот не тільки за умови існування ВДП чи режиму генерування у діоді Гана, досліджено спектральні характеристики відгуку дрейфової швидкості на різні амплітуди імпульсів електричного поля, за якими отримано граничні частоти для різних матеріалів, які перевищують значення 1000 ГГц, особливо для нітриду алюмінію. Цікаво, що помічено вплив механізму розсіювання на спектральні властивості. Але, зважаючи на те, що кожен вид розсіювання має свій час релаксації і відповідно свою частоту зіткнень, неважко зрозуміти, що така кореляція є природньою.

6. Отримано характеристики тестових твердотільних структур та зроблено порівняння модельних та експериментальних даних.

### Список опубликованных работ за темой диссертации:

[1] Куликов К. В., Москалюк В. А., Ханжиев Д. С. Насыщение дрейфовой скорости и упругость рассеяния. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», 2001. т. 11. с.100–104.

URL: [http://old.elc.kpi.ua/images/pdf/soderjanie/Soderjanie\\_11.pdf](http://old.elc.kpi.ua/images/pdf/soderjanie/Soderjanie_11.pdf) (дата звернення 16.09.2020)

[2] Куликов К. В., Москалюк В. А. Высокочастотная проводимость GaAs. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», 2002. т. 17, с.40-43

URL: [http://old.elc.kpi.ua/images/pdf/soderjanie/Soderjanie\\_17.pdf](http://old.elc.kpi.ua/images/pdf/soderjanie/Soderjanie_17.pdf) (дата звернення 16.09.2020)

[3] Куликов К. В., Москалюк В. А. Аналитический метод расчета времен релаксации в 2D полупроводниковых структурах. Ів.-Франк.: Матеріали ІХ міжнар. конф. «Фізика і технологія тонких плівок», 2003. т. 1, с.93-94.

[4] Куликов К. В., Москалюк В. А. Времена релаксации и высокочастотная проводимость GaAs. Севастополь: Материалы 13-й межд. конф. «СВЧ-техника и телекомм. технологии» (КрыМиКо'2003), 2003. с.491-492

DOI: 10.1109/CRMICO.2003.158908

[5] Куликов К. В., Москалюк В. А. Импульсная проводимость GaAs в сильном электрическом поле. К.: Вісник Державного університету інформаційно-комунікаційних технологій, 2005. т. 3, № 3-4, с.169-172.

[6] Куликов К. В. Переходные процессы в GaAs в сильном электрическом поле. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Проблемы электроники», 2006. с.31-34.

[7] Куликов К. В., Москалюк В. А. Пикосекундная релаксация в GaAs. Севастополь: 16-я межд. конф. «СВЧ-техника и телекомм. технологии», Севастополь: Вебер, 2006. с.633-634.

DOI: 10.1109/CRMICO.2006.256136

[8] Куликов К. В., Москалюк В. А. Частотные свойства GaN в сильном электрическом поле. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Проблемы электроники», 2007. с.38-40.

[9] Куликов К. В., Москалюк В. А. Механизмы рассеяния и параметры нитрида галлия. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Проблемы электроники», 2008. т. 1-2, № 1, с.10-13.

URL: [http://old.elc.kpi.ua/images/pdf/Arhiv%201/Elc%20\(42-43\)%201-2%202008.pdf](http://old.elc.kpi.ua/images/pdf/Arhiv%201/Elc%20(42-43)%201-2%202008.pdf) (дата звернення 16.09.2020)

[10] Куликов К. В., Москалюк В. А. Высокочастотные параметры нитрида галлия. К.: Техника и приборы СВЧ, 2008. т. 2. с.48-52.

URL: [http://www.tkea.com.ua/svc/2008/2\\_2008/st\\_11.htm](http://www.tkea.com.ua/svc/2008/2_2008/st_11.htm) (дата звернення 16.09.2020)

[11] Куликов К. В., Москалюк В. А. Частотные параметры нитрида галлия в сильных полях. К.: Вісник Державного університету інформаційно-комунікаційних технологій, 2009. т. 7, № 3, с.306-309.

[12] Куликов К. В., Москалюк В. А. Всплеск дрейфовой скорости в нитриде галлия. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», 2009. т. 4-5, с.28-31.

URL: [http://journals.kpi.ua/publications/text/2009\\_2\\_28\\_31.pdf](http://journals.kpi.ua/publications/text/2009_2_28_31.pdf) (дата звернення 16.09.2020)

[13] Bayda I., Kulikov K., Moskaliuk V. Electron heating during intervalley scattering. 2016 IEEE 36th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2016. pp.17-20.

DOI: 10.1109/ELNANO.2016.7493000

[14] Baida I., Kulikov K., Moskaliuk V., V. Timofeyev V. Aspects of Intervalley Scattering Simulation Considering Short-wavelength Phonons. 2018 International Conference on Information and Telecommunication Technologies and Radio Electronics (UkrMiCo), Odessa, Ukraine, 2018. pp. 1-4.

DOI: 10.1109/UkrMiCo43733.2018.9047529

ISBN: 9781538652640

[15] Kulikov K., Baida I., Moskaliuk V., Timofeyev V. Conductance Cutoff of A3B5 Nitrides at High-Frequency Region. 2018 IEEE 38th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2018. pp.101-105.

DOI: 10.1109/ELNANO.2018.8477497

[16] Kulikov K., Moskaliuk V., Timofeyev V. Modeling Conductance Cutoff of GaN, AlN and InN at High-frequency Region. 2019 IEEE 39th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2019. pp.191-196.

DOI: 10.1109/ELNANO.2019.8783773

[17] Байда І. П., Куліков К. В., Москалюк В. О., Тимофєєв В. І.. Релаксаційні процеси у субмікронних гетеротранзисторах з системою квантових ям. К.: Мікросистеми, Електроніка та Акустика (ISSN 2523-4455), 2019. т. 24. № 2. с.14-24.

DOI: 10.20535/2523-4455.2019.24.2.169269

[18] Куліков К. В., Москалюк В. О., Тимофєєв В. О. Високочастотні властивості GaN, AlN та InN. К.: Мікросистеми, Електроніка та Акустика (ISSN 2523-4455), 2019. т. 24. № 3. с.20-32.

DOI: 10.20535/2523-4455.2019.24.3.178841

[19] Куликов К. В., Москалюк В. А., Тимофеев В. И. Нитрид галлия: оценка частотных свойств в сильном поле. К.: Тези II Международная научно-техническая конференция «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології» COMINFO'2006, 2006.

[20] Куликов К. В., Москалюк В. А. Частотные свойства нитрида галлия в сильном электрическом поле. К.: Тези доп. міжн. н.-техн. конф. «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології» COMINFO'2008, 2008. с. 108.

[21] Kulikov K., Moskaliuk V., Timofeev V. High-frequency conductance cutoff of gallium nitride. 2017 IEEE International conference of information-telecommunication technologies and radio electronics (UkrMiCo'2017)/ Materials of scientific and technical conference, Odessa, Ukraine, 2017. pp.317-319.

DOI: 10.1109/UkrMiCo42337.2017

[22] 2.4. Kulikov K., Moskaliuk V., Timofeyev V. Electron transport in quantum well heterotransistors., Bulgaria, Svishtov, SworldJournal, 2020, issue №6., part 6, pp. 14–25.

DOI: 10.30888/2663-5712.2020-06-06-137 (публікація у країні ЄС)

## Анотації

**Куліков К.В. Метод моделювання імпульсних та частотних характеристик III-нітридів.**

**Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук (доктора філософії) за спеціальністю 05.27.01 "Твердотільна електроніка". – Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ, 2020.

У рукопису запропоновано метод моделювання і аналізу імпульсних та високочастотних властивостей багатодолинних напівпровідників. Модель застосовано до сучасних, актуальних і, як буде доведено у тому числі у рукописі, перспективних напівпровідникових матеріалів GaN, AlN і InN, які зараз все більше стають відомі під узагальнюючою назвою III-нітриди. Метод відрізняється можливістю застосування одночасно як для динамічних задач у часі, так і змінних у просторі полів та збалансованим використанням обчислювальних ресурсів без істотних втрат точності.

Базисом запропонованого підходу є чисельне рішення системи диференціальних рівнянь, які отримані з кінетичного рівняння Больцмана у наближенні часу релаксації по функції розподілу у  $k$ -просторі. Ці рівняння відомі під узагальненою назвою релаксаційних. В англomовній літературі цей метод зустрічається під назвою «Method of moments» (метод моментів). Але на відміну від традиційного використання рівнянь для концентрації носіїв, їх імпульсу і енергії у праці використано замість рівняння релаксації енергії рівняння для електронної температури як міри середньої енергії тільки хаотичного руху. Друга принципова відмінність полягає в тому, що часи релаксації визначаються через усереднення квантовомеханічних швидкостей розсіювання, зазвичай використовуваних у методі Монте-Карло, для окремих видів розсіювання, а не як інтегральні значення із статичних характеристик матеріалу. Різні механізми розсіювання носіїв враховуються через специфічні для них часи релаксації за допомогою проведення усереднення за максвеллівською функцією розподілу в наближенні електронної температури. Система отриманих рівнянь включає рівняння у частинних похідних як за часом так і за координатами, що дає можливість дослідити характерні прояви імпульсних властивостей напівпровідникових матеріалів, зокрема: «балістичний транспорт» носіїв у просторі та ефект «сплеску» дрейфової швидкості у часі.

Вперше розглянуто використання Фур'є-перетворення імпульсної залежності дрейфової швидкості носіїв для обчислення максимальних частот, на яких у напівпровіднику можлива провідність. Форма спектральної характеристики швидкості дрейфу носіїв демонструє зв'язок з механізмами розсіювання, які переважають в даному електричному полі. Властивості III-



нітридів у сильному електричному полі проаналізовано у частотній області і робиться порівняння з опублікованими методами оцінки максимальних частот провідності напівпровідникових матеріалів. Показано, що граничні частоти збільшуються із зростанням напруженості електричного поля і складають для III-нітридів сотні гігагерців, а для нітриду алюмінію зокрема перевищують тисячу гігагерців. Це пов'язано, за висновками роботи, з найбільшими для нього міждолинними відстанями і відповідно з порівняно ослабленим міждолинним розсіюванням.

Проведений аналіз просторового прояву ефекту «сплеску» демонструє можливість балістичного прольоту носіїв (практично без зіткнень) у сильному полі на відстані до сотих і десятих часток мікрометра.

**Ключові слова** — нітрид галію; нітрид алюмінію; нітрид індію; III-нітриди; механізми розсіювання; міждолинне розсіювання; часи релаксації; сильне електричне поле; балістичний транспорт; динамічні характеристики; гранична частота

**Kulikov K.V. Method for modeling the pulse and frequency characteristics of III-nitrides. –**

**A qualifying scientific work as a manuscript.**

The thesis for Ph.D. degree (technical sciences) on 05.27.01 specialty "solid-state electronics". – National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Kyiv, 2020.

The dissertation work proposed a method for modeling and interpreting the high-frequency characteristics of multi-valley semiconductors, in particular, GaN, AlN, and InN. The model is practiced to state-of-the-art, encouraging, and relevant materials GaN, AlN, and InN, which are now recognized under the generic name III-nitrides. The method is noticed by the economical use of computational resources without meaningful loss of accuracy and the feasibility of using both for dynamic tasks over time and variables in the scope of fields.

The introduced approach is based on solving a system of differential equating, which are known as relaxation equations and are obtained from the Boltzmann kinetic equating in the relaxation time approximation by averaging over k-space. In English literature, this method is known as the "method of momentum." Indifference to the traditional system of equations for the concentration of carriers, their momentum, and energy, here, alternately of the energy relaxation equation, the equation for electron temperature is done as a measure of the energy of only chaotic movement. The second meaningful difference is that the relaxation times are not defined as integral values from the static properties of the material, but for averaging the quantum-mechanical scattering rates usually used in the Monte Carlo method for particular types of scattering. The averaging was made over the Maxwell

distribution function in the electron temperature approximation, as an outcome of which numerous mechanisms of carrier scattering through their explicit relaxation times are taken into account. Since the system of equations applied includes equations in partial derivatives concerning time and coordinates, it performs it possible to examine the characteristic demonstrations of the impulse properties of the materials under consideration, particularly, the time effect of the “overshoot” of drift velocity and the spatial “ballistic transport” of carriers.

For the first time, the use of the Fourier transform of the impulse dependence of the carrier drifts velocity to calculate the highest frequencies inherent in a semiconductor is recognized. A relationship was found between the contour of the spectral characteristic of the drift velocity and the scattering mechanisms that predominate in a given electric field. The characteristics of III-nitrides in the frequency region in a strong electric field are investigated and correlated with existing methods for predicting cut-off frequencies. It is determined that the limiting frequencies increase with increasing electric field strength and result in hundreds of gigahertz, and for aluminum nitride, it passes one thousand gigahertz. This is due, obviously, to the greatest for him inter-valley distances and, therefore, with a decreased inter-valley scattering. The study of the spatial manifestation of the splash effect gives the possibility of an approximately collisionless, ballistic flight of electrons in a strong field at ranges up to hundredths and tenths of a micrometer.

**Keywords** — III-nitrides; gallium nitride; aluminum nitride; indium nitride; scattering mechanisms; inter-valley scattering; relaxation times; strong electric field; overshoot; dynamic performance; cutoff frequency